



ÁREA TEMÁTICA: MONITORAMENTO AMBIENTAL

**AVALIAÇÃO AMBIENTAL DE UM CICLO DE
DESTILAÇÃO DE ETANOL ATRÁVES DE CÁLCULO
DE EXERGIAS DE CADA COMPONENTE**

Rafael Henrique Pinto e Silva – rhapsrafaelhenrique@gmail.com

Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais



1. RESUMO

Este documento apresenta informações referentes a avaliação ambiental de um ciclo de destilação de etanol. O ciclo foi redesenhado a partir do programa COCO, e desenvolvido na Northern Arizona University, situada em Flagstaff. O autor é responsável pelo uso do programa para cálculo das exergias de cada componente do ciclo.

Palavras-chave: COCO, Exergia, Northern Arizona University.

2. INTRODUÇÃO/OBJETIVO

O conceito de exergia é a capacidade de produzir trabalho. Este conceito é ligado a irreversibilidade dos processos, a transformação da energia em trabalho, e a indicação do limite até onde a energia pode ser útil.

Devido ao crescimento de estudos baseados na relação de energia e meio ambiente, vários especialistas (pesquisadores, cientistas) sugeriram o conceito de exergia para analisar os impactos do meio ambiente graças a utilização dos recursos energéticos (Pires, 2007).

O objetivo deste trabalho é avaliar o grau de impacto ambiental de uma síntese de metanol, através dos cálculos de exergias. A síntese de metanol foi simulada na Northern Arizona University, através do software COCO. Este trabalho é um extensão do uso do COCO, com uma finalidade ambiental.

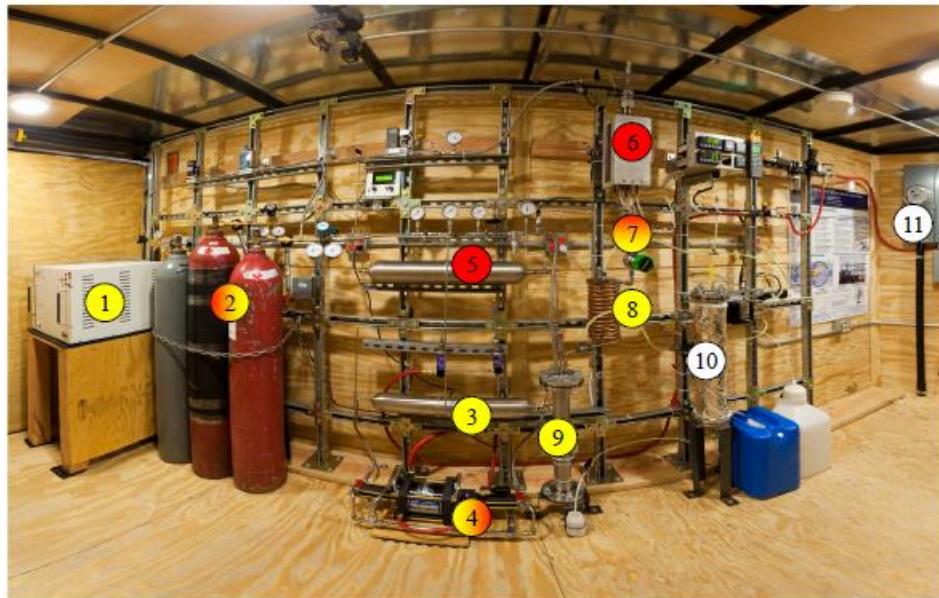
3. METODOLOGIA

Para o estudo, foi utilizado como base um estudo feito por professores do departamento de Engenharia Mecânica da Northern Arizona University. Este estudo consiste na simulação de uma síntese de metanol, cujo sistema foi ilustrado utilizando-se o software COCO.

A figura 1 a seguir ilustra a unidade de síntese de metanol, cujos dados foram extraídos para a ilustração no software COCO. Os números na figura representam cada componentes, sendo que alguns não foram representados tanto no arquivo feito pelo Dr. Morgan, quanto pelo autor do artigo: 1 é onde ocorrerá a eletrolise, 2 é aonde estão armazenados os gases de síntese, 3 é o regulador de baixa pressão, 4 é o compressor, 5 é

o compressor de alta pressão, 6 é o reator de síntese, 7 é a válvula de expansão, 8 é o condensador, 9 é o separador de vapor, 10 é a coluna de destilação, e 11 é a caixa de fusíveis.

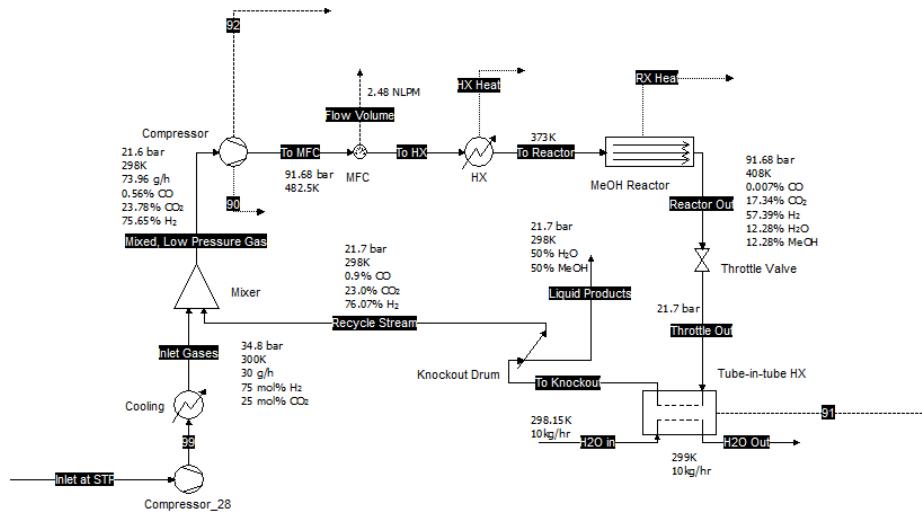
Figura 1- Mecanismo de síntese do metanol



Fonte: Practical Experience with a Mobile Methanol Synthesis Device

Com o mesmo software, o processo foi refeito, mas com medidores cujos dados foram utilizados para a obtenção dos valores tanto das energias, quanto das exergias de cada componente. A figura 2 demonstra o sistema antes de ser refeito pelo autor do trabalho, para os cálculos tanto da energia quanto da exergia.

Figura 2 - Desenho original da síntese de Metanol com o software COCO



Fonte: Practical Experience with a Mobile Methanol Synthesis Device

Os cálculos utilizando-se o software foram baseados na primeira e segunda lei da Termodinâmica. Em cada componente, foi introduzida uma equação relacionada a quantidade de exergia destruída ou o fluxo de exergia do ciclo. Pela primeira lei, tem-se a expressão:

$$E_2 - E_1 = Q - W \quad (1)$$

Em que E_2 e E_1 são as energias de saída e entrada, respectivamente, e Q é o calor gerado e W o trabalho realizado. Todas esses valores estão em W . No geral, a exergia em um ponto é definida por:

$$E = m \times (h - T \times s) \quad (2)$$

Em que m é o fluxo de massa em kg/s , s a entropia correspondente em $(J/(kg \times K))$, e T a temperatura ambiente (em K). Para o cálculo do fluxo de energia em um componente em que há trabalho, é utilizada a seguinte expressão no COCO:

$$Ex = W - E_2 - E_1 \quad (3)$$

Já nos componentes onde existe trocas de calor, a exergia correspondente será calculada pela seguinte expressão:



$$Ex = E_2 - E_1 + (1 - \frac{T_A}{T_B}) \times Q \quad (4)$$

Em que TA e TB correspondem, respectivamente, as temperaturas de entrada e saída, em K. Finalmente, para o cálculo do fluxo de exergia do reator de síntese do metanol, foi calculado primeiramente a exergia de cada uma das reações computadas no reator do programa.



Infelizmente o software não apresenta os valores de exergia de cada componente, logo foi necessário uma consulta externa para o obtenção destes valores e grava-los no software a seguir para os posteriores cálculos. A tabela 1 mostra as seguintes exergias químicas de cada componente, utilizadas para o cálculo da exergia da reação dos produtos (MeOH e CO).

Tabela 1 - Exergia química padrão de cada substâncias das reações

Gás	Exergia química (kJ/mol)
CO2	19,48
H2	236,09
H2O	0,9
CO	274.71
MeOH	720

Fonte: SHAPIRO (2004)

Para o cálculo da exergia de formação produtos, foi igualado o somatório da exergia dos produtos mais o somatório da exergia dos reagentes.

$$M \times (CO_2 + 3H_2 - MeOH - H_2O + R \times T \times \log \frac{mfH_2^3}{mfMeOH \times mfH_2O}) \rightarrow Exergia\ de\ MeOH \quad (6)$$

$$M \times (CO_2 + H_2 - CO - H_2O + R \times T \times \log \frac{mfH_2}{mfCO \times mfH_2O}) \rightarrow Exergia\ de\ CO$$

Em que M é a massa molar da mistura (em kg/kmol), mf é a fração molar de cada substância, R é a constante dos gases (9,314598 kJ//K×kmol), e T a temperatura ambiente em K.



Após os cálculos de exergia de formação dos produtos, é calculado a exergia na entrada e na saída igual os processos anteriores (exergia física), mas como na reação a porcentagem de cada componente altera, um novo cálculo é computado para saber o novo fluxo de massa. Enfim, a expressão para o fluxo de exergia do reator fica da seguinte forma:

$$Ex = E_1 - E_2 - (E_a - E_b) \quad (7)$$

Em que E_a e E_b são as exergias químicas dos produtos.

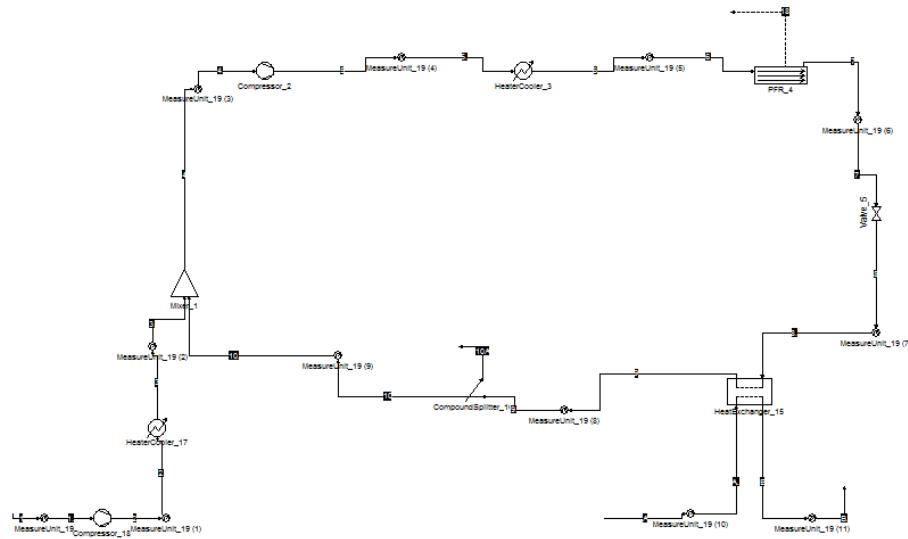
Após o cálculo do fluxo de energia e exergia de todos os componentes, os valores foram tabelados utilizando-se uma planilha do Microsoft Excel. Nesta mesma planilha, foi calculado a taxa de poluição de cada componente, no qual é o quociente da exergia de entrada dividido pelo trabalho produzido ou exergia do produto final do processo.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Conforme dito anteriormente, o fluxo de síntese de metanol foi refeito utilizando o mesmo software. A figura 3 demonstra uma simplificação do fluxograma da síntese do metanol, uma vez que a versão completa não caberá neste trabalho. Em cada seta, foi adicionado um medidor para a obtenção de valores do fluxo (temperatura, entalpia, entropia), para o cálculo das exergias correspondentes.



Figura 3 - Novo desenho da síntese de Metanol com o software COCO



Fonte: Elaboração própria

As figuras 3, 4 e 5 a seguir demonstra alguns dos valores para o cálculo das exergias. A figura 3 ilustra as propriedades do fluido (pressão, temperatura, porcentagem de cada composto, vazão), enquanto a figura 4 ilustra as propriedades do fluido no estado gasoso e a figura 6 no estado líquido. É notável que após a entrada do fluido no reator, o componente existira tanto no estado líquido quanto no gasoso.

Figura 4 - Dados do fluido em cada componente (pressão, temperatura, fração de massa)

name	para o compressor	para o trocador de calor	para o reator	para a válvula	para o trocador de calor tipo tubo	para o separador de gás	para o misturador	unit
Overall								
pressure	2159.753	9167.9344	9167.9344	9168.0167	2169.753	2169.753	2169.753	kPa
temperature	24.727253	178.43063	100	141.34264	108.20914	24.99951	24.99951	°C
mass fraction [Carbon monoxide]	0.0056586534	0.0056586534	0.00565...	0.0056...	0.0056579142	0.0056586568	0.0075023187	
mass fraction [Carbon dioxide]	0.93687255	0.93687255	0.93687255	0.7206...	0.72069604	0.72081667	0.95566784	
mass fraction [Hydrogen]	0.0574688	0.0574688	0.0574688	0.0277...	0.027762381	0.027779071	0.036829842	
mass fraction [Water]	0	0	0	0.0884...	0.088490698	0.088441321	0	
mass fraction [Methanol]	0	0	0	0.1573...	0.15739297	0.15730428	0	
flow	3.3910344e-05	3.3910344e-05	3.39103...	3.3910...	3.3910321e-05	3.3910324e-05	2.5577011e-05	kg/s
MW	20.000788	20.000788	20.000788	24.891785	24.891785	24.888354	24.843031	kg/kmol

Fonte: COCO



Figura 6 - Dados do fluido em cada componente no estado gasoso (entalpia, densidade, entropia, energia interna, número de Gibbs, calor específico)

name	para o compressor	para o trocador de calor	para o reator	para a válvula	para o trocador de calor tipo tubo	para o separador de gás	para o misturador	unit
Vapor properties								
density	17.955871	49.250339	61.374095	72.923746	17.854715	22.631209	22.720271	kg/m ³
internalEnergy	-133.51475	49.973211	-59.587267	-13.349137	-20.22558	-110.71175	-110.01631	kJ/kg
enthalpy	-13.233587	236.12288	89.79065	112.37146	101.29711	-14.837373	-14.51776	kJ/kg
enthalpyF	-8412.5895	-8163.2331	-8309.5653	-8374.7741	-8370.587	-8573.0312	-8589.2067	kJ/kg
entropy	-1.0105253	-0.92580439	-1.2817394	-0.75833352	-0.32034489	-0.80928985	-0.81703638	kJ/kgK
entropyF	7.3004573	7.3851782	7.0292432	6.4997757	6.9400222	6.3053616	6.2613952	kJ/kgK
gibbsEnergy	287.7789	654.19821	568.07169	426.69512	223.46356	226.452	229.08124	kJ/kg
heatCapacityCp	1.6836019	1.8685465	1.8686024	1.7605586	1.5334855	1.42806	1.4185431	kJ/kgK

Fonte: COCO

Figura 5 - Dados do fluido em cada componente no estado líquido (entalpia, densidade, entropia, energia interna, número de Gibbs, calor específico)

name	para o compressor	para o trocador de calor	para o reator	para a válvula	para o trocador de calor tipo tubo	para o separador de gás	para o misturador	unit
Liquid properties								
density	750.66764	807.45356	855.47276					kg/m ³
internalEnergy	-1267.593	-1565.5824	-1652.9149					kJ/kg
enthalpy	-1255.3799	-1562.8952	-1650.3786					kJ/kg
enthalpyF	-10906.223	-11692.25	-10539.246					kJ/kg
entropy	-3.4001624	-4.1216707	-4.5123853					kJ/kgK
entropyF	5.2510699	4.9220487	3.9120006					kJ/kgK
gibbsEnergy	153.96238	8.9415466	-305.01316					kJ/kg
heatCapacityCp	4.348426	4.3260054	3.8401785					kJ/kgK

Fonte: COCO

Com todos estes valores, foi possível pelo software o cálculo das exergias de cada componente, para que os mesmos possam ser reescritos em uma tabela no Excel. Utilizando este aplicativo do pacote Office, a tabela 2 ilustra a taxa de destruição de cada componente. Vale ressaltar que para cada componente foram utilizados critérios diferentes para a obtenção do trabalho e da exergia de entrada. Para o misturador, a válvula e o separador de gás, foi considerado que o trabalho é exergia de saída calculada no ponto correspondente (equação 1). Para o compressor, foi considerado o trabalho (W) uma vez que o valor existe neste componente. Para os trocadores de calor, foram considerados o calor trocado (Q). Finalmente, para o reator, a diferença entre as exergias dos produtos da reação mais a exergia pela equação 1 foi considerada a exergia de entrada, e o trabalho foi considerado como a exergia de saída.



Tabela 2 - Taxa de destruição de cada componente do ciclo de síntese de metanol

Componente	Trabalho (W)	Exergia de entrada (W)	Taxa de destruição
Misturador	5,50	10,1142	1,83969
Compressor	10,11	6,7034	0,66277
Trocador de Calor	16,00	0,0007	0,00004
Reator	29,11	8,8669	0,30460
Válvula Borboleta	8,87	4,8308	0,54481
Trocador de Calor tipo Tubo	4,83	11,9152	2,46649
Separador de vapor	3,15	5,8561	1,85856

Fonte: Elaboração própria

Segundo Bejarano (2004), quando a taxa de poluição total é maior que 1, as emissões dos processos provocam um grande impacto no meio ambiente, mas se estiver entre 0 e 1, os processos apresentam um impacto ambiental em função de limitações tecnológicas dos processos de conversão de energia.

Desta forma, considerando o sistema como um todo, ele apenas tem um trocador de calor, o separador e o misturador como grandes impactantes ao meio ambiente. Já os demais componentes não apresentam um impacto significativo. Esses valores pequenos na realidade já eram esperados pelo fato da síntese de metanol ser um processo alternativo para outras fontes de energia, já que o metanol não polui o meio ambiente como outros gases convencionais.

5. CONCLUSÕES/RECOMENDAÇÕES

O software COCO provou ser uma ferramenta não só para a análise termodinâmica de ciclos convencionais como o Rankine, mas também como uma ferramenta de análise ambiental. Isto pelo fato do software possibilitar cálculos como o trabalho e as exergias em cada componente de vários ciclos, tais como o da síntese de metanol, conforme foi apresentado no trabalho.

Os resultados obtidos foram bons, e demonstram que a produção de metanol pode ser um passo à frente para a produção de combustíveis cujo impacto ambiental é o menor possível. Da mesma forma que o COCO pode ser uma ferramenta importante para estudos de outros combustíveis.



6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Livro

MORAN, Michael J., SHAPIRO, Howard N. **Fundamentals of Engineering Thermodynamics**. 5 th Edition 2004.

Artigo de periódico

ACKER, Thomas L., MORGAN, Eric R. **Practical Experience with a Mobile Methanol Synthesis Device**. Northern Arizona University Department of Mechanical Engineering.

Monografia, dissertação e tese

ROJAS, Sílvia Palma. **ANÁLISE EXERGÉTICA, TERMOECONÔMICA E AMBIENTAL DE UM SISTEMA DE GERAÇÃO DE ENERGIA. ESTUDO DE CASO: USINA TERMOELÉTRICA UTE – RIO MADEIRA**. Brasília, 195 p., 2007. Dissertação (mestrado) – Universidade de Brasília. Disponível em: http://repositorio.unb.br/bitstream/10482/2826/1/2007_SilviaIlennaPRojas.pdf

Trabalho em evento

PINTO E SILVA, Rafael. **COCO 2.07 Users Guide Summary**. Northern Arizona University Sustainable Energy Solutions.

Internet

VAN BATEN, Jasper. **COCO Software**. Disponível em: http://www.cocosimulator.org/index_download.html.